

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: ПАНОВ Юрий Петрович  
Должность: Ректор  
Дата подписания: 03.11.2023 14:15:58  
Уникальный программный ключ:  
e30ba4f0895d1683ed43800960e77389e6cbff62

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Российский государственный геологоразведочный университет имени Серго Орджоникидзе"**

(МГРИ)

## Физико-химическое моделирование процессов рабочая программа дисциплины (модуля)

Закреплена за кафедрой **Химии**  
Учебный план s210502\_23\_MG23.plx  
Специальность 21.05.02 ПРИКЛАДНАЯ ГЕОЛОГИЯ  
Квалификация **Горный инженер-геолог**  
Форма обучения **очная**  
Общая трудоемкость **4 ЗЕТ**

Часов по учебному плану 144  
в том числе:  
аудиторные занятия 51,35  
самостоятельная работа 65,65  
часов на контроль 27

Виды контроля в семестрах:  
экзамены 9  
курсовые работы 9

### Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	9 (5.1)		Итого	
	УП	РП		
Неделя	14 4/6			
Вид занятий	УП	РП	УП	РП
Лекции	32	32	32	32
Практические	16	16	16	16
Иные виды контактной работы	3,35	3,35	3,35	3,35
В том числе инт.	2	2	2	2
Итого ауд.	51,35	51,35	51,35	51,35
Контактная работа	51,35	51,35	51,35	51,35
Сам. работа	65,65	65,65	65,65	65,65
Часы на контроль	27	27	27	27
Итого	144	144	144	144

**1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

1.1	• формирование у будущих горных инженеров-геологов современных представлений о физико-химических закономерностях, лежащих в основе природных процессов, и методах анализа минералов и компонентов гидротермальных растворов;
1.2	• освоение студентами фундаментальных понятий, законов и методов современной геохимии при исследовании и познании природных процессов.

**2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ) В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ**

Цикл (раздел) ОП:	
<b>2.1</b>	<b>Требования к предварительной подготовке обучающегося:</b>
2.1.1	Для освоения программы по дисциплине «Физико-химическое моделирование процессов» учащийся должен иметь неоконченное высшее техническое образование и обладать базовыми знаниями в области геохимии, петрографии и минералогии.
<b>2.2</b>	<b>Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:</b>
2.2.1	Современные методы обработки минералогической, петрологической и геохимической информации

**3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)****УК-1: Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, выработать стратегию действий****Знать:**

Уровень 1	структуру задач, выделяя ее базовые составляющие, осуществляет декомпозицию задачи
Уровень 2	основы системного подхода к решению задач профессиональной деятельности; взаимосвязь факторов, определяющих решение задач

**Уметь:**

Уровень 1	проводить поиск информации, необходимой для решения профессиональных задач, выявлять структуру задач, выделяя ее ключевые составляющие
Уровень 2	проводить анализ информации в соответствии с поставленными профессиональными задачами; определять возможные варианты решения задачи, оценивая их достоинства и недостатки; классифицировать факты, интерпретации, оценки в открытых и специализированных источниках информации;

**Владеть:**

Уровень 1	навыками аргументации на основе анализа информации при обсуждении подходов к решению профессиональных задач; навыками определения и оценки последствий возможных решений задачи;
Уровень 2	навыками определения и оценки последствий возможных решений задачи; навыками декомпозиции задачи; навыками разработки плана действий по решению поставленных задач;

**УК-6: Способен определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки и образования в течение всей жизни****Знать:**

Уровень 1	условия и ограничения успешного выполнения порученной работы на основе собственных личностных, ситуативных, профессиональных качеств и возможности их совершенствования
Уровень 2	основы эффективного использования времени и других ресурсов при решении поставленных задач, а также относительно полученного результата

**Уметь:**

Уровень 1	применять знания о своих ресурсах и их пределах (личностных, ситуативных, временных и т.д.), для успешного выполнения порученной работы
Уровень 2	определять приоритеты собственной деятельности с учетом условий, средств, личностных возможностей, этапов карьерного роста, временной перспективы развития деятельности и требований рынка труда

**Владеть:**

Уровень 1	навыками реализации намеченных целей деятельности с учетом условий, средств, личностных возможностей, этапов карьерного роста, временной перспективы развития деятельности и требований рынка труда
Уровень 2	способами оценки эффективности использования времени и других ресурсов при решении поставленных задач, а также относительно полученного результата

**ПК-4.4: Способен проводить технические расчеты по проектам, технико-экономический и функционально-стоимостный анализ эффективности проектов**

<b>Знать:</b>	
Уровень 1	основы проектной деятельности; правила публичного представления результатов проектов; основные правовые нормы при проектировании и реализации проектов
Уровень 2	специфику проектной деятельности в профессиональной сфере; ограничения и нормы, предусмотренные законодательством в профессиональной области, которые необходимо учитывать при проектировании и реализации проектов; основы планирования и проектирования работ
<b>Уметь:</b>	
Уровень 1	проектировать решение конкретной задачи проекта, выбирая оптимальный способ ее решения, исходя из действующих правовых норм и имеющихся ресурсов и ограничений; определять в рамках поставленной цели проекта совокупность взаимосвязанных задач, обеспечивающих ее достижение
Уровень 2	решать конкретные задачи проекта заявленного качества и за установленное время; публично представлять результаты решения конкретной задачи проекта
<b>Владеть:</b>	
Уровень 1	навыками проектирования решений конкретной задачи проекта с учетом оптимальных способов ее решения на основе действующих правовых норм и имеющихся ресурсов и ограничений
Уровень 2	навыками публичного представления результатов решения конкретной задачи проекта и проекта в целом; навыками оформления результатов выполнения проекта

**ПСК-4.1.: Способностью выполнять полевое изучение, диагностику кристаллов, минералов, горных пород и техногенных минеральных образований с использованием современных методов исследований**

<b>Знать:</b>	
Уровень 1	методы изучения кристаллов, минералов, горных пород и техногенных минеральных образований.
Уровень 2	методы изучения, диагностики кристаллов, минералов, горных пород и техногенных минеральных образований с использованием современных методов исследований.
<b>Уметь:</b>	
Уровень 1	пользоваться аппаратурой для изучения кристаллов, минералов, горных пород и техногенных минеральных образований.
Уровень 2	пользоваться современной аппаратурой для изучения кристаллов, минералов, горных пород и техногенных минеральных образований.
<b>Владеть:</b>	
Уровень 1	методами изучения, диагностики кристаллов, минералов, горных пород и техногенных минеральных образований.
Уровень 2	методами изучения, диагностики кристаллов, минералов, горных пород и техногенных минеральных образований с использованием современных методов исследований.

**В результате освоения дисциплины (модуля) обучающийся должен**

<b>3.1</b>	<b>Знать:</b>
3.1.1	• Современные методы физико-химического анализа минералов и компонентов растворов;
3.1.2	• Современные методы термодинамического моделирования природных геохимических процессов.
<b>3.2</b>	<b>Уметь:</b>
3.2.1	• Создавать термодинамические модели гидротермальных процессов мобилизации и отложения рудного вещества;
3.2.2	• Анализировать результаты компьютерного моделирования с учетом современных уравнений состояния компонентов исследуемых систем;
3.2.3	• Планировать и ставить эксперимент гидротермального преобразования минералов.
<b>3.3</b>	<b>Владеть:</b>
3.3.1	• навыками лабораторного эксперимента в области прикладной геохимии;
3.3.2	• методами построения термодинамических моделей геохимических процессов.

**4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

Код занятия	Наименование разделов и тем /вид занятия/	Семестр / Курс	Часов	Компетенции	Литература	Инте ракт.	Примечание
	<b>Раздел 1. Основы термодинамики.</b>						
1.1	Основы термодинамики. /Лек/	9	4		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Э1 Э2	0	

1.2	Основы термодинамики. /СР/	9	6		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Э1 Э2	0	
	<b>Раздел 2. Зависимость химического потенциала от температуры.</b>						
2.1	Зависимость химического потенциала от температуры. /Лек/	9	4		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2 Э1 Э2	0	
2.2	Зависимость химического потенциала от температуры. /Пр/	9	2		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Э1 Э2	0	
2.3	Зависимость химического потенциала от температуры. /СР/	9	4		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Э1 Э2	0	
	<b>Раздел 3. Уравнение состояния жидкой воды</b>						
3.1	Уравнение состояния жидкой воды. /Лек/	9	4		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Э1 Э2	0	
3.2	Уравнение состояния жидкой воды. /Пр/	9	2		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Э1 Э2	0,25	
3.3	Уравнение состояния жидкой воды. /СР/	9	6		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Э1 Э2	0	
	<b>Раздел 4. Химический потенциал компонента водного раствора.</b>						
4.1	Химический потенциал компонента водного раствора. /Лек/	9	4		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Э1 Э2	0	
4.2	Химический потенциал компонента водного раствора. /СР/	9	6		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Э1 Э2	0	
	<b>Раздел 5. Поведение сильных электролитов в гидротермальных условиях.</b>						
5.1	Поведение сильных электролитов в гидротермальных условиях. /Лек/	9	4		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Э1 Э2	0	
5.2	Поведение сильных электролитов в гидротермальных условиях. /Пр/	9	2		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Э1 Э2	0,5	
5.3	Поведение сильных электролитов в гидротермальных условиях. /СР/	9	6		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Э1 Э2	0	
	<b>Раздел 6. Учёт неидеальности поведения компонентов.</b>						
6.1	Учёт неидеальности поведения компонентов. /Лек/	9	4		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Э1 Э2	0	

6.2	Учёт неидеальности поведения компонентов. /Пр/	9	2		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Э1 Э2	0,5	
6.3	Учёт неидеальности поведения компонентов. /СР/	9	6		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Э1 Э2	0	
<b>Раздел 7. Равновесия в многокомпонентных системах.</b>							
7.1	Равновесия в многокомпонентных системах. /Лек/	9	2		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2	0	
7.2	Равновесия в многокомпонентных системах. /Пр/	9	2		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Э1 Э2	0,25	
7.3	Равновесия в многокомпонентных системах. /СР/	9	8		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Э1 Э2	0	
<b>Раздел 8. Современные методы расчёта равновесий в мультисистемах.</b>							
8.1	Современные методы расчёта равновесий в мультисистемах. /Лек/	9	2		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Э1 Э2	0	
8.2	Современные методы расчёта равновесий в мультисистемах. /Пр/	9	2		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Э1 Э2	0,5	
8.3	Современные методы расчёта равновесий в мультисистемах. /СР/	9	8		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Э1 Э2	0	
<b>Раздел 9. Программа BALANCE для расчёта равновесий в природных мультисистемах.</b>							
9.1	Программа BALANCE для расчёта равновесий в природных мультисистемах. /Лек/	9	2		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Э1 Э2	0	
9.2	Программа BALANCE для расчёта равновесий в природных мультисистемах. /Пр/	9	2		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Э1 Э2	0	
9.3	Программа BALANCE для расчёта равновесий в природных мультисистемах. /СР/	9	8		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Э1 Э2	0	
<b>Раздел 10. Термодинамическое моделирование на ЭВМ геохимических процессов.</b>							
10.1	Термодинамическое моделирование на ЭВМ геохимических процессов. /Лек/	9	2		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Э1 Э2	0	
10.2	Термодинамическое моделирование на ЭВМ геохимических процессов. /Пр/	9	2		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Э1 Э2	0	

10.3	Термодинамическое моделирование на ЭВМ геохимических процессов. /СР/	9	7,65		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Э1 Э2	0	
10.4	/ИВКР/	9	3,35		Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Э1 Э2	0	

## 5. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА

### 5.1. Контрольные вопросы и задания

Контрольные вопросы для подготовки к промежуточной аттестации:

1. Основы термодинамики. Принцип минимума функции Гиббса системы G. Химический потенциал компонента системы. Фундаментальное уравнение для химического потенциала. Уравнение Гиббса-Дюгема.
2. Зависимость химического потенциала от температуры (минералы и газы).
3. Абсолютная энтропия вещества. Уравнение Майера-Келли для температурной зависимости теплоёмкости.
4. Зависимость химического потенциала от давления.
5. Несжимаемые вещества (минералы). Учёт сжимаемости при сверхвысоких давлениях. Газы. Уравнение состояния идеального газа.
6. Вода. Уравнение состояния жидкой воды (уравнение Тейта). Температурная зависимость давления насыщенного пара H<sub>2</sub>O. 7. Критические температура и давление. Вода при сверхкритических параметрах состояния. Многопараметрическое уравнение состояния H<sub>2</sub>O.
8. Диэлектрическая проницаемость воды. Уравнение Кирквуда. Температурная и барическая зависимости диэлектрической проницаемости.
9. Химический потенциал компонента водного раствора. Физический смысл уравнения Борна для сольватной составляющей химического потенциала: электростатическая теория. Поведение термодинамических характеристик водных частиц вблизи критической точки воды: влияние сольватной составляющей химического потенциала.
10. Уравнение состояния Хелгесона-Киркхэма-Флауэрса (НКФ). Температурная и барическая зависимости теплоёмкости и объёма в рамках модели НКФ.
11. Поведение сильных электролитов в гидротермальных условиях. Зависимость химического потенциала от концентрации. Идеальные растворы и их физический смысл.
12. Уравнение Рауля. Стандартное состояние компонента идеального раствора. Растворы газов. Твёрдые растворы. Идеальные разбавленные растворы и их физический смысл. Уравнение Генри. Стандартное состояние компонента идеального разбавленного раствора.
13. Учёт неидеальности поведения компонентов. Коэффициент активности. Учёт неидеальности газов. Уравнение состояния реального газа: уравнение Редлиха-Квонга. Коэффициент активности реального газа: влияние температуры и давления. 14. Правило Льюиса-Рендалла для газовых смесей. Учёт неидеальности смешения газов.
15. Причины неидеальности поведения растворов электролитов. Коэффициент активности иона. Уравнение Дебая-Хюккеля: физический смысл постоянных A и B, их зависимость от температуры и давления.
16. Равновесия в многокомпонентных системах. Правила фаз. Мультисистемы. Потенциал Коржинского как критерий направленности процессов в открытых системах.
17. Современные методы расчёта равновесий в мультисистемах. Метод минимизации термодинамического потенциала. Ограничивающие условия баланса массы. Решение задачи минимизации: метод множителей Лагранжа и симплекс - метод.
18. Программа BALANCE для расчёта равновесий в природных мультисистемах. Работа с программой. Создание файлов задачи (\*. DAT): выбор независимых компонентов, матрица стехиометрических коэффициентов и вектора состава. Учет окислительно-восстановительных процессов. Расчёт и присоединение файла термодинамических потенциалов компонентов. Расчёт равновесия в заданной P-T-x точке: выбор фазового состава (предварительный расчет) и точный расчет.
19. Термодинамическое моделирование на ЭВМ геохимических процессов. Методология построения модели и задачи моделирования.
20. Термодинамические модели некоторых природных процессов: образование коры выветривания, гидротермальная система в океанической коре (чёрные курильщики).

Задания для текущего контроля представлены в Приложении 1.

### 5.2. Темы письменных работ

К письменным работам по дисциплине «Физико-химическое моделирование процессов» относятся курсовые работы.

Примерные темы курсовых работ:

«Экспериментальное и термодинамическое исследование растворимости минерала в водно-солевом флюиде в присутствии минерального буфера при повышенных температурах и давлениях»

Примечание: тип минерала, состав флюида, тип минерального буфера, диапазон параметров температуры и давления задаётся преподавателем индивидуально для каждого обучаемого студента.

Минералы, предлагаемые для изучения растворимости: Самородная медь, самородное серебро, самородное золото, свинец металлический, цинк металлический, хлораргирит, аргентит, халькозин, халькопирит, куприт, борнит, галенит, сфалерит.

Минеральные буферы, предлагаемые для изучения растворимости минералов: Пирит-пирротин-магнетит, пирит-гематит-магнетит, калишпат-мусковит-кварц

Составы водно-солевых флюидов, предлагаемые для изучения растворимости минералов:  $H_2O - NaCl$  (0.1 – 1 моль  $\square$  кг<sup>-1</sup>),  $H_2O - KCl$  (0.1 – 1 моль  $\square$  кг<sup>-1</sup>)  
 Диапазон температур и давлений, предлагаемых для изучения растворимости минералов: 350 – 500 °С, давление насыщенного пара  $H_2O$  – 1500 бар.

### 5.3. Оценочные средства

Рабочая программа дисциплины «Физико-химическое моделирование процессов» обеспечена оценочными средствами для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации, включающими контрольные вопросы для проведения промежуточной аттестации, билеты для проведения промежуточной аттестации.

Все оценочные средства представлены в Приложении 1.

### 5.4. Перечень видов оценочных средств

Оценочные средства разработаны для всех видов учебной деятельности студента – лекций, практических занятий, самостоятельной работы и промежуточной аттестации. Оценочные средства представлены в виде:

средств итогового контроля – промежуточной аттестации: экзамена в 9 семестре.

## 6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

### 6.1. Рекомендуемая литература

#### 6.1.1. Основная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год
Л1.1	Акинфиев Н. Н.	Методы решения и примеры оформления заданий по физической химии: учебно-практическое пособие	М.: РГГРУ, 2006
Л1.2	Акинфиев Н. Н., Епифанова С. С.	Исследование в учебном практикуме по химии. Термодинамика. Растворы: учебно-практическое пособие	М.: РГГРУ, 2011
Л1.3	Умрихин В. А.	Физическая химия [Электронный ресурс/Текст]: учебное пособие	М.: РГГРУ, 2009
Л1.4	Акинфиев Н. Н.	Методы термодинамического моделирования геохимических процессов в гидротермальных системах [Электронный ресурс МГРИ] : конспект лекций	М.: МГРИ, 2019

#### 6.1.2. Дополнительная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год
Л2.1	Отв. ред. В.А. Жариков, В.В. Федькин	Очерки физико-химической петрологии	М.: Наука, 1991
Л2.2	Борисов М. В., Шваров Ю. В.	Термодинамика геохимических процессов	М., 1992
Л2.3	С.Р. Крайнов, Ю.В. Шваров, Д.В. Гричук и др.	Методы геохимического моделирования и прогнозирования в гидрогеологии	М.: Недра, 1988
Л2.4	Булах А. Г., Кривовичев В. Г.	Расчет минеральных равновесий	Ленинград: Недра, 1985

### 6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"

Э1	Электронные ресурсы библиотеки МГРИ
Э2	ООО «Книжный Дом Университета» (БиблиоТех)

## 7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Аудитория	Назначение	Оснащение	Вид
6-47	Учебные аудитории для проведения занятий семинарского типа.	Аквадистиллятор ДЭ-10 - 1 шт., стол аудиторный - 9 шт., стул на металлической основе деревянный - 19 шт., стеллаж открытый металлический 4 секционный - 1 шт., тумба - 6 шт., мойка - 1 шт., шкаф лабораторный с тумбой - 2 шт., портрет Бутлерова - 1 шт., портрет Ломоносова - 1 шт.	

5-38a	Компьютерный класс, аудитория для самостоятельной работы, контроля и промежуточной аттестации	14 моноблоков, 1 преподавательский моноблок, стол преподавательский -1 шт., в аудитории развернута беспроводная сеть WiFi и подключен доступ в интернет	
-------	---	---	--

#### **8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

Методические указания по изучению дисциплины «Физико-химическое моделирование процессов» представлены в Приложении 2 и включают в себя:

1. Методические указания для обучающихся по организации учебной деятельности.
2. Методические указания по организации самостоятельной работы обучающихся.
3. Методические указания по организации процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.